

Defekty i pułapkowanie nośników ładunku w luminoforach $\text{Lu}_2\text{O}_3:\text{Ln},\text{M}$ wykazujących długotrwałą poświatę lub trwale magazynujących energię – obliczenia ab initio

W typowym procesie fotoluminescencyjnym, pewna cząsteczka, molekula lub atom, ulega wzbudzeniu ze swojej formy o najniższej energii – poziomu podstawowego – do formy o wyższej energii, jednego ze stanów wzbudzonych. Pobudzona cząsteczka minimalizuje swoją energię poprzez powrót do stanu podstawowego z oddaniem zbędnej energii w formie cząsteczki światła – fotonu. Można patrzeć na ten proces również w inny sposób, mianowicie, po wzbudzeniu, jeden elektron z poziomu podstawowego przechodzi na wyższy poziom, a później powraca emitując światło. W ciałach stałych rzeczy nieco się komplikują, z racji mnóstwa poziomów o podobnych energiach które tworzą tak zwane pasma. Pasma o niższych energiach są obsadzone elektronami, natomiast pasma o wyższych energiach są puste. Grupę obsadzonych pasm nazywamy pasmem walencyjnym, natomiast grupę pustych – pasmem przewodnictwa. Ponieważ poziomy w paśmie walencyjnym są wypełnione, elektrony w nich nie mogą się poruszać. Natomiast, w paśmie przewodnictwa elektron ma dużo pustych poziomów do wyboru. Po wzbudzeniu do pasma przewodnictwa, elektron może wędrować tam dość długo zanim powróci do pasma walencyjnego – i tu właśnie w grę wchodzi defekty.

Wyobraźmy sobie pusty poziom energetyczny pomiędzy pasmem przewodnictwa a pasmem walencyjnym. Pobudzony elektron może zrelaksować do takiego poziomu, po czym zostanie tam pułapkowany – z racji nieobecności w pobliżu innych poziomów o podobnej energii. Takie zjawisko nazywamy pułapkowaniem nośników ładunku. Pułapkowany elektron może zostać uwolniony poprzez otrzymanie porcji energii wystarczającej do wzbudzenia z powrotem do pasma przewodnictwa. Inteligentne opracowanie odpowiednich poziomów defektowych poprzez dodanie do materiału małych ilości pewnych pierwiastków (domieszek) oraz poprzez warunki syntezy skutkuje przetrzymaniem elektronów w stanach pułapkowych i, z tego powodu, istotnie przedłużonymi czasami życia emisji. Co więcej, w niektórych materiałach elektrony mogą pozostać w pułapkach tak długo jak jest potrzeba – aż zostaną uwolnione poprzez pewną stymulację (np. za pomocą naświetlania laserem).

Istotą obecnego projektu jest analiza (za pomocą zaawansowanych obliczeń kwantowo-mechanicznych) różnych pułapek nośników ładunku w tlenku lutetu Lu_2O_3 , które mogą być stworzone poprzez dodanie metali s, d oraz f, takich jak Ca, Sr, Ti, Zr, Hf, V, Ta, Tb, Pr oraz innych. Schemat działania polega na zastosowaniu mniej dokładnych i szybszych obliczeń do optymalizacji geometrii układów z defektami, a później bardziej dokładnych obliczeń do analizy struktury elektronowej. Celem jest sprawdzenie mechanizmów tworzenia stanów pułapkowych poprzez poszczególne domieszki oraz defekty, a tak że określenie głębokości pułapek. Taka wiedza jest niezbędna do zrozumienia działania luminescencji długotrwałej (poświaty) oraz magazynowania energii, polepszenia parametrów luminoforów oraz poszukiwania nowych materiałów i zastosowań.